# Structures moléculaires et spectres de RMN

*- Corrigé -*

## *1. Protons équivalents*

- Application :

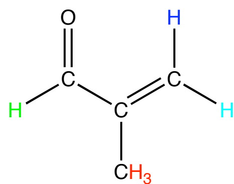
Pour chaque molécule citée ci-dessous, dénombrer les groupes de protons chimiquement équivalents.

| | | |
|---|---|---|
| Ethane | $H_3C-CH_3$ | 1 groupe de protons |
| Propane | $H_3C-CH_2-CH_3$ | 2 groupes de protons |
| Hydroxybenzène | $C_6H_5OH$ (HC, HC, CH, CH, CH, C–OH) | 4 groupes de protons |
| 3-chlorophénylméthanal | O=C(H) ; HC, HC, CH, CH ; C–Cl | 5 groupes de protons |
| Cyclohexène | $H_2C$, $H_2C$, $CH_2$, $CH_2$, CH=CH | 3 groupes de protons |
| Ethène | $H_2C=CH_2$ | 1 groupe de protons |
| (Z)-1,2-dichloroéthène | ClHC=CHCl (Cl, Cl ; H, H) | 1 groupe de protons |
| (E)-1-chloropropène | ClHC=CH–$CH_3$ (H, $CH_3$ ; Cl, H) | 3 groupes de protons |

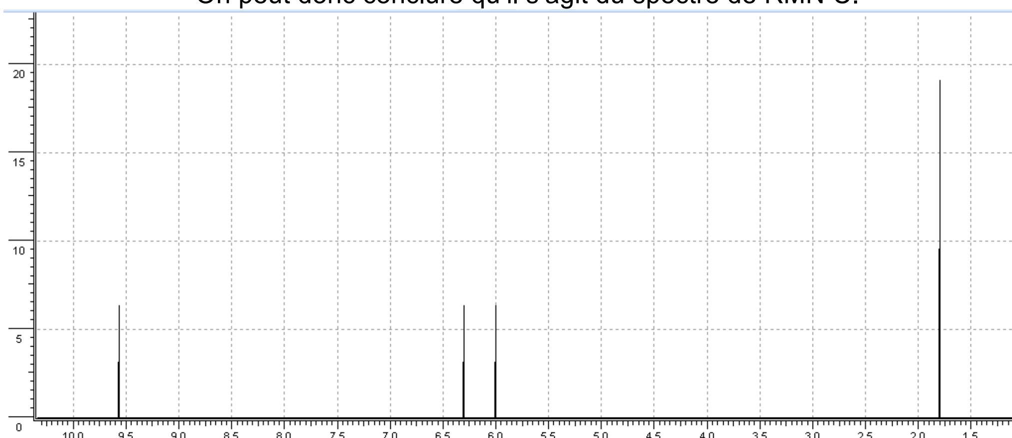
VISIT…

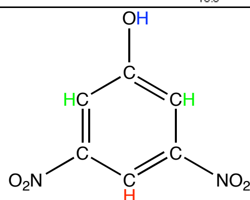
LANZAROTE Caliente.com

***3. Spectres de RMN***

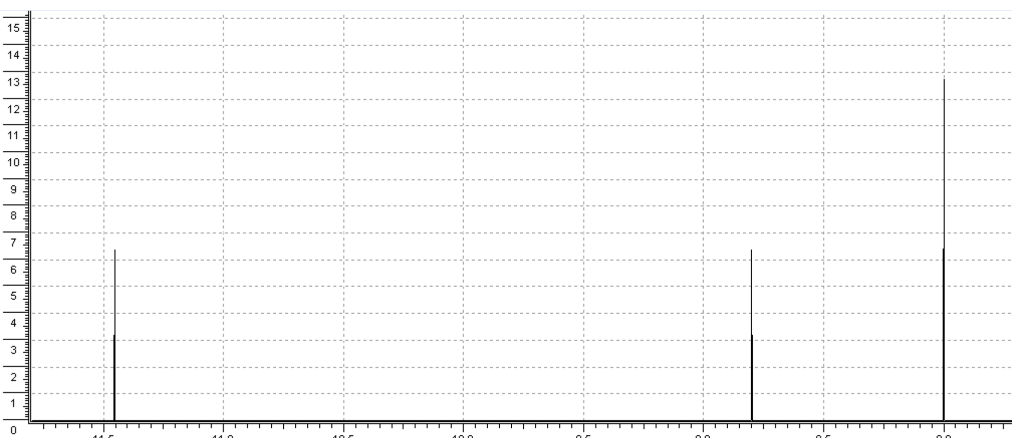


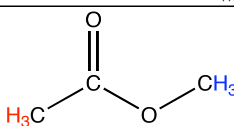

Cette molécule présente 4 groupes de protons équivalents, donc le spectre de RMN contiendra 4 signaux.
Le proton de la fonction aldéhyde (-H) a un déplacement caractéristique à 9,5-10 ppm.
Les deux protons éthyléniques (-H et –H) ont des déplacements chimiques caractéristiques à 4,5-6,5 ppm.
On peut donc conclure qu'il s'agit du spectre de RMN C.



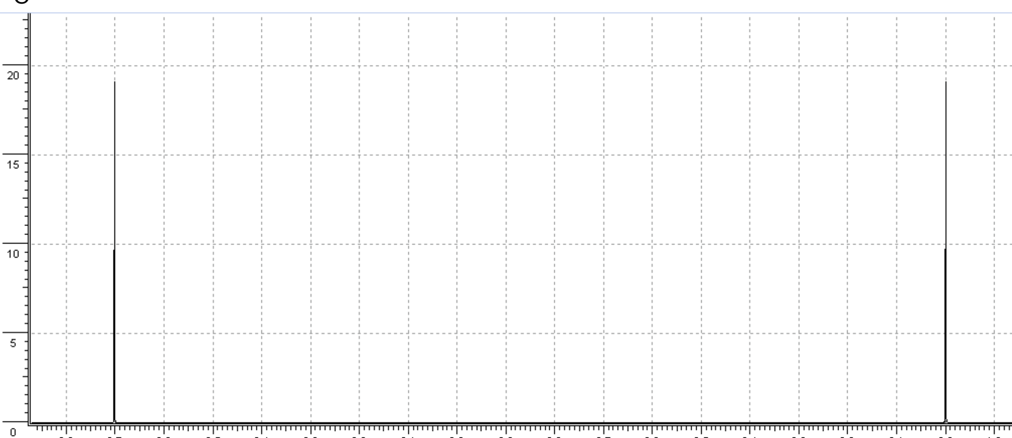



Cette molécule présente 3 groupes de protons équivalents, donc le spectre de RMN sera composé de 3 signaux.
Les protons du cycle benzylique (-H et -H) ont un déplacement caractéristique à 6,5-8 ppm.
On peut donc conclure qu'il s'agit du spectre de RMN A.

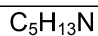




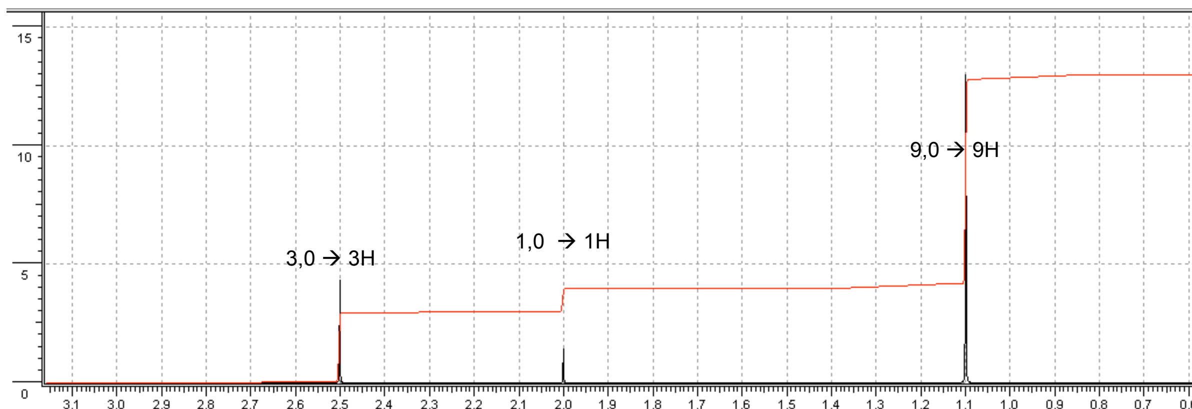

Cette molécule présente 2 groupes de protons équivalents, donc le spectre de RMN sera composé de 2 signaux.

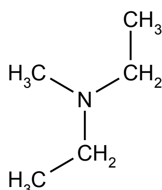


➤ Application :

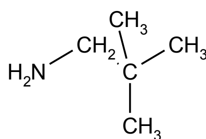



La courbe d'intégration a une hauteur h = 13,0 ; comme la molécule possède 13 protons, on en déduit l'échelle verticale de la courbe d'intégration : 1 proton <-> 1,0 :

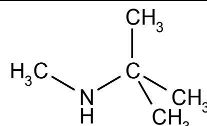


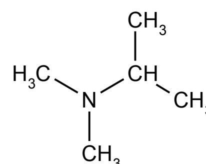

3 groupes de protons différents : le spectre de RMN de cette molécule est composé de 3 signaux avec une courbe d'intégration qui augmenterait de 3,0 , 4,0 et 6,0.




3 groupes de protons différents : le spectre de RMN de cette molécule est composé de 3 signaux avec une courbe d'intégration qui augmenterait de 2,0 , 2,0 et 9,0.




3 groupes de protons différents : le spectre de RMN de cette molécule est composé de 3 signaux avec une courbe d'intégration qui augmenterait de 3,0 , 1,0 et 9,0.
**Il s'agit donc de la molécule qui correspond au spectre ci-dessus.**




3 groupes de protons différents : le spectre de RMN de cette molécule est composé de 3 signaux avec une courbe d'intégration qui augmenterait de 6,0 , 1,0 et 6,0.

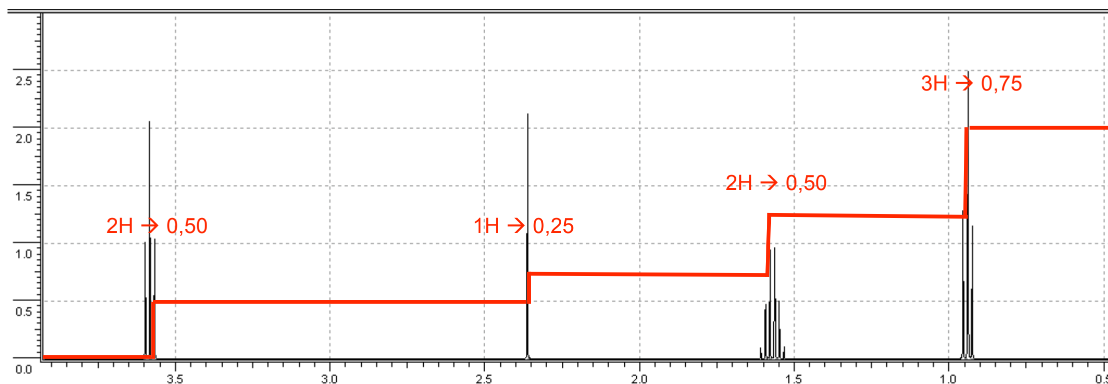
## *4. Notion de couplage*

- Application:

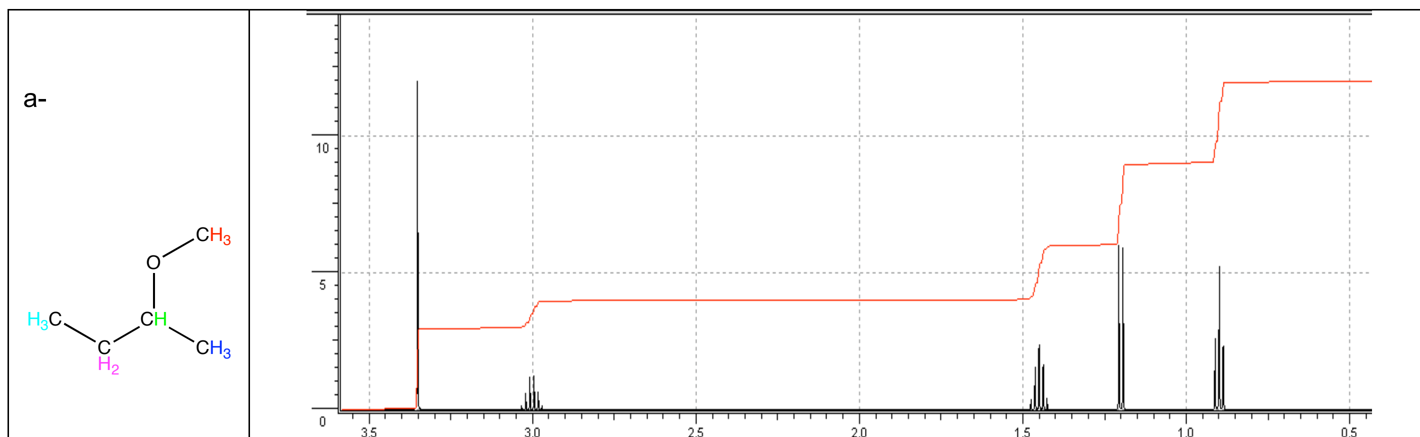
a- Remplir le tableau suivant : $CH_3$-$CH_2$-$CH_2$-OH Cette molécule est constituée de 8 protons.

| Groupe de protons équivalents | Nombre de voisins | Multiplicité | Déplacement chimique (ppm) |
|---|---|---|---|
| $CH_3$- | 2 | triplet (2 + 1) | 0,9 |
| -$CH_2$- | 5 (3 + 2) | sextuplet (5 + 1) | 1,6 |
| -$CH_2$- | 2 | triplet (2 + 1) | 3,6 |
| -OH | 0 | singulet (0 + 1) | 2,4 |

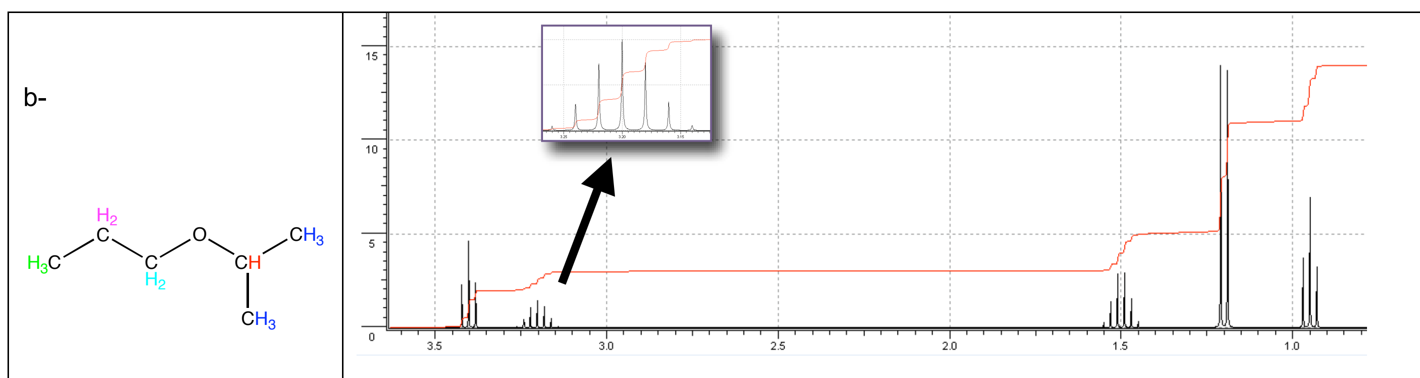
b- En prenant pour échelle verticale : 1 proton <-> 0,25



## ***5. Analyse qualitative***



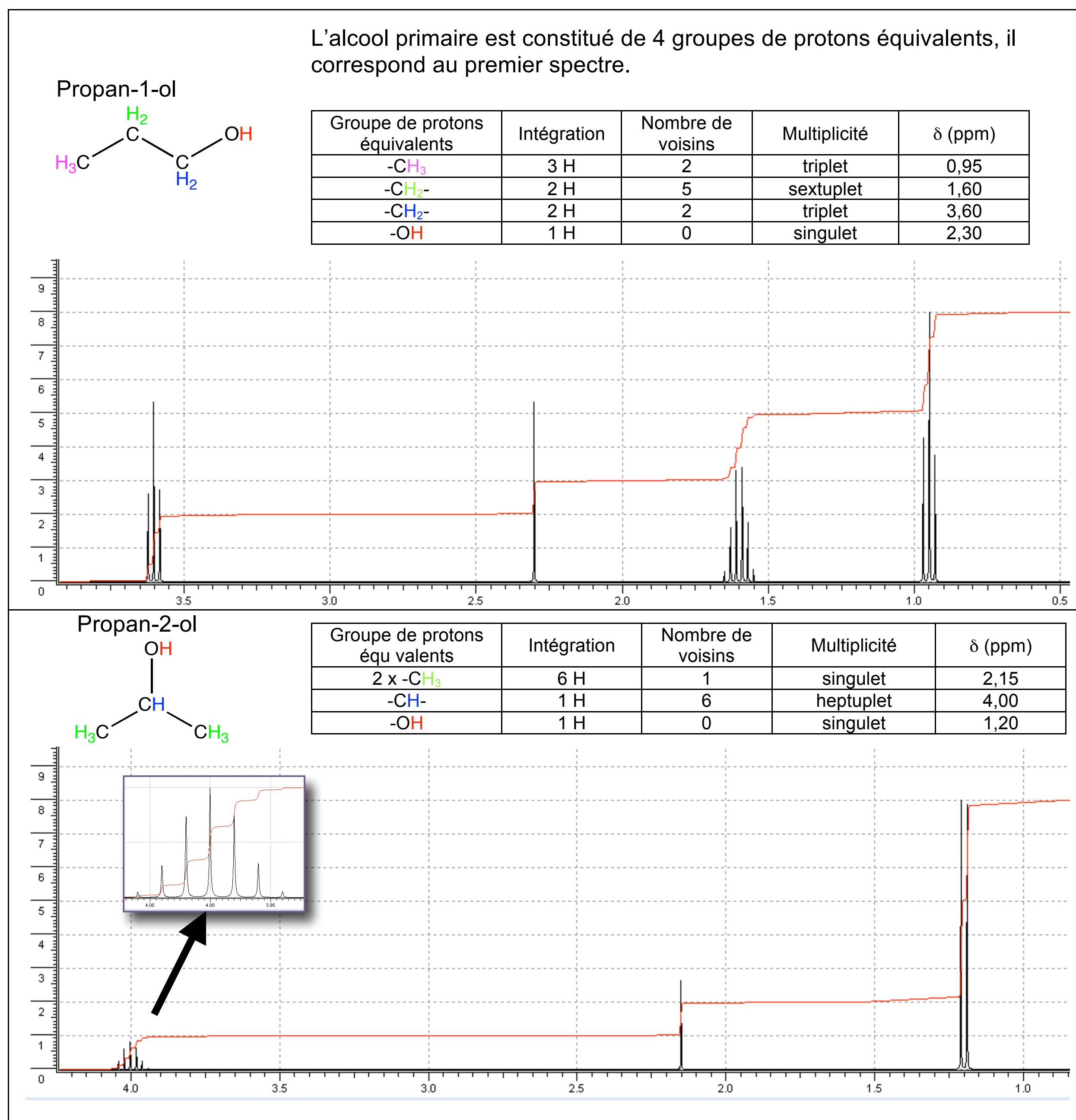

| Déplacement chimique (ppm) | Intégration | Multiplicité | Nombre de voisins ***(multiplicité -1)*** | Groupe de protons équivalents |
|---|---|---|---|---|
| 3,35 | 3 H | singulet | 0 | $-CH_3$ |
| 3,00 | 1 H | sextuplet | 5 | $-CH-$ |
| 1,45 | 2 H | quintuplet | 4 | $-CH_2-$ |
| 1,20 | 3 H | doublet | 1 | $-CH_3$ |
| 0,90 | 3 H | triplet | 2 | $-CH_3$ |




| Déplacement chimique (ppm) | Intégration | Multiplicité | Nombre de voisins | Groupe de protons équivalents |
|---|---|---|---|---|
| 3,40 | 2 H | triplet | 2 | $-CH_2-$ |
| 3,20 | 1 H | heptuplet | 6 | $-CH-$ |
| 1,50 | 2 H | sextuplet | 5 | $-CH_2-$ |
| 1,20 | 6 H | doublet | 1 | 2 x $-CH_3$ |
| 0,95 | 3 H | triplet | 2 | $-CH_3$ |

## ***6. Analyse structurale***

a-

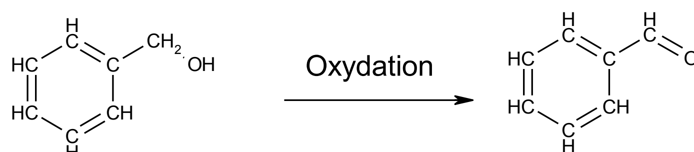



L'alcool primaire est constitué de 4 groupes de protons équivalents, il correspond au premier spectre.

| Groupe de protons équivalents | Intégration | Nombre de voisins | Multiplicité | δ (ppm) |
|---|---|---|---|---|
| $-CH_3$ | 3 H | 2 | triplet | 0,95 |
| $-CH_2-$ | 2 H | 5 | sextuplet | 1,60 |
| $-CH_2-$ | 2 H | 2 | triplet | 3,60 |
| -OH | 1 H | 0 | singulet | 2,30 |

| Groupe de protons équ valents | Intégration | Nombre de voisins | Multiplicité | δ (ppm) |
|---|---|---|---|---|
| 2 x $-CH_3$ | 6 H | 1 | singulet | 2,15 |
| -CH- | 1 H | 6 | heptuplet | 4,00 |
| -OH | 1 H | 0 | singulet | 1,20 |

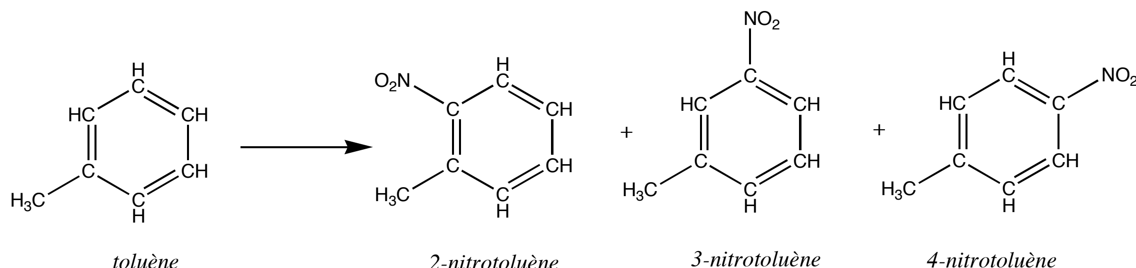
b-




La réaction s'est bien déroulée car le spectre de RMN du produit de la synthèse est bien celui de l'aldéhyde benzoïque (benzaldéhyde). Les deux éléments qui permettent de justifier cette réponse sont :

- Le signal à δ = 10,0 ppm est caractéristique d'un proton d'une fonction aldéhyde (singulet d'intégration 1 H).
- Le spectre de RMN présente 4 groupes de protons équivalents (dont 3 qui sont aromatiques) ; le spectre de l'alcool en présenterait 5 (dont 3 aromatiques).

c- Lors de la substitution électrophile aromatique par un groupe nitro ($-NO_2$) sur le toluène, le groupe nitro peut se fixer en position 2, 3 ou 4 pour donner les composés suivants.




*toluène* *2-nitrotoluène* *3-nitrotoluène* *4-nitrotoluène*

Etudions les caractéristiques des spectres de RMN de chacun des trois produits de nitration du toluène :

*2-nitrotoluène*

Le spectre de RMN du 2-nitrotoluène présentera 5 signaux :

| Groupe de protons équivalents | Intégration | Nombre de voisins | Multiplicité |
|---|---|---|---|
| $-CH_3$ | 3 H | 0 | singulet |
| -CH- | 1 H | 1 | doublet |
| -CH- | 1 H | 2 | triplet |
| -CH- | 1 H | 2 | triplet |
| -CH- | 1 H | 1 | doublet |

*3-nitrotoluène*

Le spectre de RMN du 3-nitrotoluène présentera 5 signaux :

| Groupe de protons équivalents | Intégration | Nombre de voisins | Multiplicité |
|---|---|---|---|
| $-CH_3$ | 3 H | 0 | singulet |
| -CH- | 1 H | 1 | doublet |
| -CH- | 1 H | 2 | triplet |
| -CH- | 1 H | 1 | doublet |
| -CH- | 1 H | 0 | singulet |

*4-nitrotoluène*

Le spectre de RMN du 4-nitrotoluène présentera 3 signaux :

| Groupe de protons équivalents | Intégration | Nombre de voisins | Multiplicité |
|---|---|---|---|
| $-CH_3$ | 3 H | 0 | singulet |
| -CH- | 2 H | 1 | doublet |
| -CH- | 2 H | 1 | doublet |

Le spectre de RMN du produit majoritaire présente trois signaux dont deux doublets de 2 H chacun et un singulet de 3 H, il s'agit donc du 4-nitrotoluène.